



PROGRAMA INSTITUCIONAL DE BOLSAS DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA PIBIC

RELATÓRIO FINAL

Predição de Séries Temporais Baseada em Redes Neurais Artificiais

Submetido à
Pró-Reitoria de Pesquisa da Universidade Estadual de Campinas

Departamento de Engenharia de Computação e Automação Industrial (DCA)
Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação (FEEC)
Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)
CEP 13083-852, Campinas - SP

Aluno: João Pedro de Oliveira Pagnan
Orientador: Prof. Levy Boccato

Campinas, 29 de agosto de 2021

1 Introdução

Depois de uma exposição sobre certos modelos preditores com redes neurais artificiais e sobre as características principais de sistemas com dinâmica caótica, apresentados no relatório parcial (seções 2.1 e 2.2, respectivamente), este relatório final irá expor os cenários utilizados para a análise, a metodologia utilizada, os resultados obtidos e, por fim, as conclusões desta pesquisa sobre o desempenho de redes neurais artificiais na predição de séries temporais originadas por sistemas com dinâmica caótica, além de alguns detalhes sobre as arquiteturas estudadas nesta segunda parte da pesquisa, que foram a *Gated Recurrent Unit* (GRU) [1] e a *Echo State Network* (ESN) [2].

A seção 2 apresenta os quatro cenários escolhidos para a análise do desempenho das redes neurais, sendo dois destes a tempo discreto e dois a tempo contínuo. No caso, os sistemas a tempo discreto foram o mapa de Hénon [3] e o mapa logístico [4]. Já os sistemas a tempo contínuo foram o sistema de Lorenz [5] e as equações de Mackey-Glass [6].

Já na seção 3, discutiremos os dois modelos previamente citados que foram estudados e implementados, juntamente com as redes neurais apresentadas no relatório parcial, nesta segunda parte da pesquisa.

A seção 4 realiza uma exposição da busca em grade [7] realizada em cada modelo, expondo quais foram os parâmetros testados e os critérios definidos para o processo de busca. Além disso, a seção 4 também apresentará a metodologia utilizada para definir o número de amostras de entrada de cada modelo preditor (nesse caso, chamado de K), além de indicar qual foi a progressão do erro quadrático médio (EQM) em função do valor de K para cada modelo nos quatro cenários.

Por fim, as seções 5 e 6 apresentam os resultados e as conclusões obtidas, respectivamente, encerrando, assim, esta pesquisa de iniciação científica.

2 Cenários escolhidos

Antes de falarmos sobre os cenários utilizados na análise, vale a pena reforçarmos as características principais de sistemas com dinâmica caótica.

Sistemas caóticos se destacam pois, apesar de serem determinísticos, apresentam dependência sensível em relação às condições iniciais (DSCI). Dessa forma, duas trajetórias que partem de posições relativamente próximas no espaço de estados podem evoluir de uma forma totalmente distinta devido às não-linearidades presentes que amplificam as diferenças entre essas condições iniciais [8].

De forma resumida, a dinâmica caótica é marcada pela presença dos seguintes aspectos [9]:

1. Forte sensibilidade com respeito às condições iniciais;

2. A evolução temporal das variáveis de estado (parâmetros de ordem do sistema) é rápida e tem uma aparência errática;
3. Um sinal originado por um sistema caótico tem espectro de potências contínuo e de faixa larga;
4. Há uma produção de informação por parte do sistema;
5. Dão origem a atratores estranhos (estruturas topológicas que ditam a evolução temporal do fluxo de um sistema caótico) [10].

Retomados os pontos principais da dinâmica caótica, daremos continuidade à discussão apresentando os cenários escolhidos para a análise. Vale mencionar que, na simulação numérica dos quatro sistemas, foram geradas 5000 amostras para cada série temporal. Além disso, nos sistemas multidimensionais, como o mapa de Hénon e o sistema de Lorenz, consideramos apenas a variável de estado x na previsão, em ambos os casos.

2.1 Sistema de Lorenz

O sistema de Lorenz foi um dos sistemas dinâmicos caóticos a tempo contínuo abordados nessa pesquisa. Este sistema foi um dos primeiros grandes trabalhos envolvendo a noção de regime caótico, sendo considerado por muitos a pesquisa que inaugurou a área [11].

Lorenz modela, através de três equações diferenciais, o fluxo de um fluido em um volume uniformemente aquecido na camada inferior e uniformemente resfriado na camada superior [5]:

$$\frac{dx}{dt} = -\sigma \cdot (x - y) \quad (1a)$$

$$\frac{dy}{dt} = x \cdot (\rho - z) - y \quad (1b)$$

$$\frac{dz}{dt} = x \cdot y - \beta \cdot z \quad (1c)$$

sendo σ , ρ e β constantes reais, estando relacionadas a certas características físicas do sistema, como o número de Prandtl, o número de Rayleigh e as dimensões do volume que o fluido ocupa [8].

Utilizando $\sigma = 10$, $\rho = 28$ e $\beta = 8/3$, Lorenz demonstrou que esse sistema de equações diferenciais exibe comportamento caótico, sendo que a maioria das condições iniciais $[x(0) \ y(0) \ z(0)] = [0 \ 0 \ 0]^T$ convergem para um atrator estranho (nesse caso, atrator de Lorenz).

A figura 1 indica a série temporal em x , que foi utilizada em nossa análise, para $[x(0) \ y(0) \ z(0)]^T = [0.1 \ 0 \ 0]^T$, e o atrator de Lorenz para a trajetória. Para a simulação, os parâmetros do sistema foram configurados para os mesmos valores utilizados por

Lorenz (exibidos no parágrafo anterior), e foi utilizado $dt = 0.01$ para resolver as equações diferenciais numericamente.

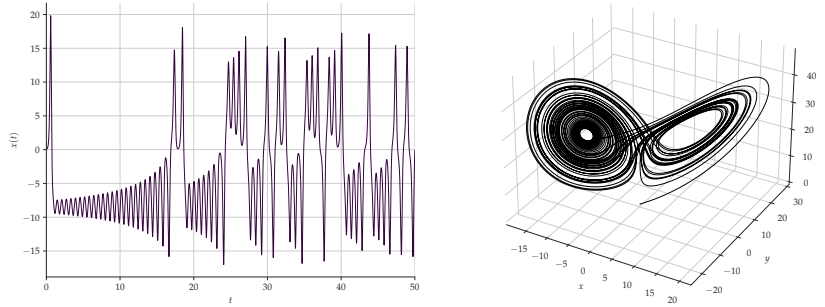


Figura 1: À esquerda, a série temporal em x do sistema de Lorenz simulado e, à direita, o diagrama de fases correspondente à simulação

2.2 Mapa de Hénon

O mapa de Hénon foi um dos sistemas a tempo discreto escolhidos para esta pesquisa. Esse sistema foi proposto por Michel Hénon em 1976 como um modelo simplificado de uma seção de Poincaré do atrator de Lorenz, sendo descrito pelas equações abaixo [3]:

$$x[n + 1] = y[n] + 1 - a \cdot (x[n])^2 \quad (2a)$$

$$y[n + 1] = b \cdot x[n] \quad (2b)$$

A presença de dinâmica caótica neste sistema discreto irá depender dos valores dos parâmetros a e b . Hénon mostrou, em sua pesquisa, que, para $a = 1.4$ e $b = 0.3$, há a presença de um atrator estranho do diagrama de fases desse sistema dinâmico discreto.

O mapa de Hénon realiza um mapeamento de dois pontos, chamados de pontos fixos. Para os valores dos parâmetros a e b mencionados anteriormente, tais pontos são dados por:

$$x = \frac{\sqrt{609} - 7}{28} \approx 0.631354477$$

$$y = \frac{3(\sqrt{609} - 7)}{280} \approx 0.189406343$$

Um desses pontos está sobre o atrator e é instável. Tal instabilidade é confirmada quando é realizada uma análise da trajetória com outros pontos próximos a este, onde percebe-se que, dependendo da região do atrator pela qual o ponto em análise se aproxima ao ponto fixo, a trajetória irá divergir ou convergir para o ponto no atrator.

A figura 2 mostra a série temporal referente à variável x e o atrator obtido com a simulação para $[x[0] \ y[0]]^T = [1 \ 0]^T$.

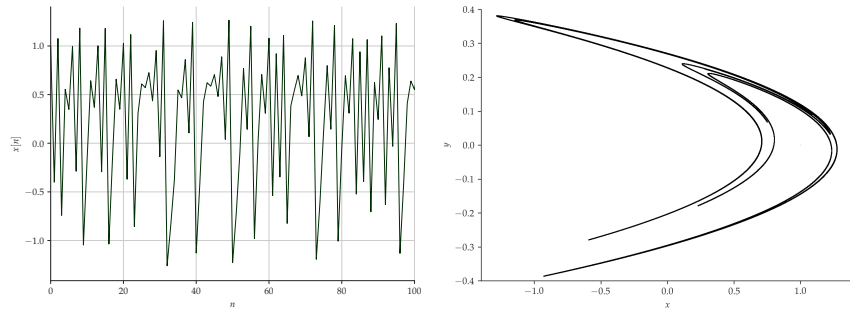


Figura 2: À esquerda, as cem primeiras iterações da série temporal em x do mapa de Hénon e, à direita, o atrator correspondente à simulação

2.3 Mapa logístico

Descrito em 1976 por Robert May, o mapa logístico representa uma das formas de modelar a população de uma determinada espécie em certos instantes de tempo [4]. A equação a diferenças que descreve esse sistema pode ser vista abaixo:

$$x[n + 1] = r \cdot x[n] \cdot (1 - x[n]) \quad (3)$$

sendo x_n um número real entre 0 e 1 que representa a razão entre o tamanho atual da população e o tamanho máximo desta, e tendo r um valor real entre 0 e 4, representando a taxa de crescimento desta população.

Nesse caso, o sistema não chega a operar em caos para qualquer valor de r . Assim, como o estudo visa analisar o desempenho para sistemas caóticos, foi utilizado $r = 3.86$, que, conforme será visto no diagrama de bifurcação abaixo, faz com que a série temporal dada pela equação (3) opere em caos.

A figura 3 indica a série temporal obtida partindo de $x[0] = 0.5$ e o diagrama de bifurcação para este sistema de equações.

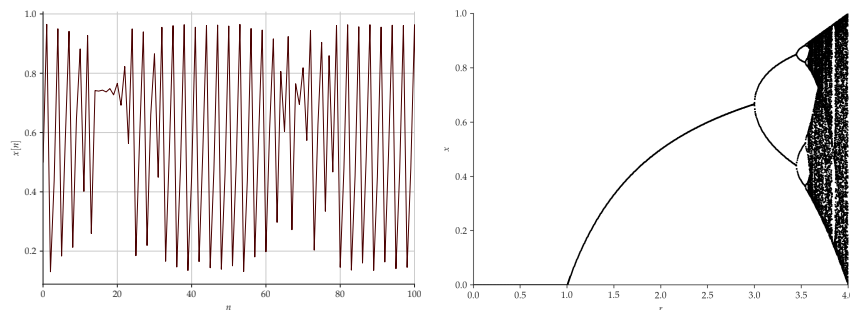


Figura 3: À esquerda, as cem primeiras iterações da série temporal do mapa logístico e, à direita, o diagrama de bifurcação deste sistema

2.4 Equações de Mackey-Glass

Por fim, o último sistema caótico simulado, também contínuo, está associado às equações de Mackey-Glass, as quais modelam o controle hormonal da produção de células brancas do sangue e podem ser vistas abaixo [6]:

$$\frac{dP(t)}{dt} = \frac{\beta_0 \cdot \theta^n}{\theta^n + P(t - \tau)^n} - \gamma \cdot P(t) \quad (4a)$$

$$\frac{dP(t)}{dt} = \frac{\beta_0 \cdot \theta^n \cdot P(t - \tau)}{\theta^n + P(t - \tau)^n} - \gamma \cdot P(t) \quad (4b)$$

sendo $P(t)$ a densidade de tais células em um instante de tempo e β_0 , θ , n , τ e γ valores reais relacionados a certos parâmetros hormonais de um organismo, geralmente sendo determinados experimentalmente.

Neste caso, conforme demonstrado em [6], a equação (4b) exibe comportamento caótico para valores mais altos de τ . Para a simulação numérica, foi utilizado $n = 10$, $\gamma = 0.1$, $\beta = 0.2$, $\theta = 1$, $\tau = 22$, $dt = 1.0$ e $P(0^-) = 0.1$, gerando novamente 5000 amostras. A série e o atrator obtidos podem ser vistos na figura 4.

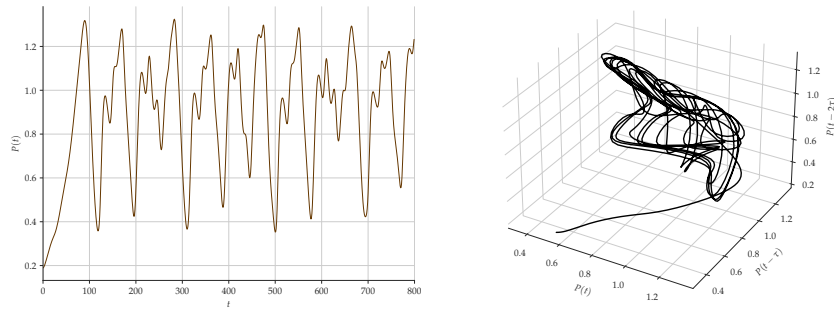


Figura 4: À esquerda, a série temporal da equação (4b) exibida de $t = 0$ a $t = 800$ e, à direita, o atrator correspondente à simulação

Com isso, finalizamos a exposição sobre os cenários de sistemas com dinâmica caótica escolhidos para a análise comparativa. Na próxima seção, falaremos a respeito dos dois modelos estudados e implementados nesta segunda parte da pesquisa. Em seguida, apresentaremos a metodologia aplicada nesses e nos outros modelos mostrados no relatório parcial, assim como as particularidades para cada caso.

3 Modelos estudados

Como o estudo de redes neurais artificiais foi iniciado na primeira metade da pesquisa, uma exposição mais detalhada dos fundamentos destes modelos (no caso, as redes MLP e as rede recorrentes LSTM) pode ser vista no relatório parcial.

Assim, as próximas duas subseções abordarão especificamente as redes recorrentes

GRU e ESN.

3.1 Gated Recurrent Unit (GRU)

Como já mencionamos anteriormente, as redes recorrentes *Gated Recurrent Unit* possuem células computacionais semelhantes às células das redes LSTM, apresentadas no relatório parcial. Sua estrutura interna pode ser vista na figura 5, juntamente com as equações que a descrevem.

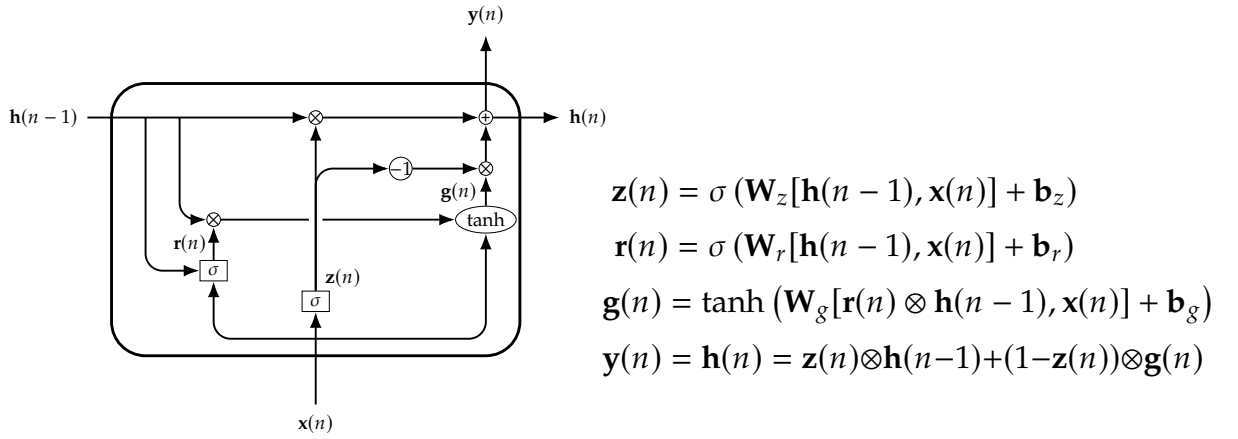


Figura 5: Estrutura e equações de uma célula GRU

Primeiramente, por ser uma rede recorrente, há uma realimentação nestas estruturas. Ou seja, a saída atual é determinada levando em conta estados passados da rede.

Mas, diferentemente da LSTM, na célula GRU há somente um vetor de estados passados $\mathbf{h}(n)$, e o vetor $\mathbf{z}(n)$ determinará se a memória $\mathbf{h}(n-1)$ será mantida ou apagada. Além disso, também é utilizado o vetor $\mathbf{r}(n)$, que controla qual parte de $\mathbf{h}(n-1)$ irá compor $\mathbf{g}(n)$.

Intuitivamente, pelo fato das GRU serem, basicamente, uma versão mais simples das redes LSTM, espera-se que a última seja melhor que a primeira. Porém, conforme mostrado em [1], em determinadas aplicações a GRU é superior à LSTM. Além disso, a implementação de um modelo preditor com a rede GRU é bem similar a implementação de um preditor baseado na LSTM. Por causa disso, incluímos a *Gated Recurrent Unit* na análise comparativa.

O outro modelo recorrente estudado nesta segunda metade da pesquisa foi as redes com estados de eco. Essas arquiteturas são relativamente distintas das outras redes neurais estudadas. Veremos então o que diferencia esse modelo dos outros na próxima subseção.

3.2 Echo State Network (ESN)

Diferentemente das redes neurais mostradas até aqui, incluindo as citadas no relatório parcial, as redes com estados de eco baseiam-se na teoria de de computação por reservatório, chamada assim pois é utilizado um reservatório de comportamentos dinâmicos que, ao serem combinados linearmente nos neurônios da camada de saída, produzem as respostas da rede aos estímulos de entrada [12].

A figura 6 apresenta a estrutura interna de uma rede ESN.

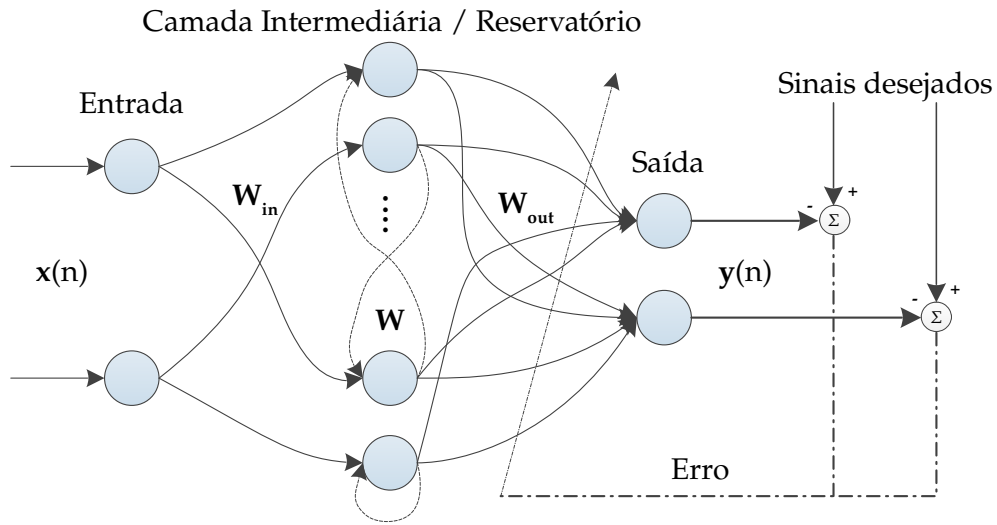


Figura 6: Estrutura típica de uma rede ESN (figura adaptada de [12])

As equações em (5) descrevem a ESN, sendo $\mathbf{x}(n)$ o vetor de entrada, $\mathbf{W}_{in} \in \mathbb{R}^{N \times K}$ os pesos da camada de entrada, $\mathbf{u}(n)$ o vetor que representa as ativações dos N neurônios não-lineares totalmente conectados do reservatório, representando os estados da rede, $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ os pesos das conexões recorrentes do reservatório, $\mathbf{f}(\cdot)$ denota as funções de ativação das unidades internas da rede, $\mathbf{W}_{out} \in \mathbb{R}^{L \times N}$ é a matriz dos pesos da camada de saída e, por fim, $\mathbf{y}(n)$ denota as saídas da rede.

$$\mathbf{u}(n + 1) = \mathbf{f}(\mathbf{W}_{in} \cdot \mathbf{x}(n + 1) + \mathbf{W} \cdot \mathbf{u}(n)) \quad (5a)$$

$$\mathbf{y}(n + 1) = \mathbf{W}_{out} \cdot \mathbf{u}(n + 1) \quad (5b)$$

O grande diferencial prático desta rede é que os pesos das conexões recorrentes dentro do reservatório \mathbf{W} são ajustados com valores fixos antes do treinamento da camada de saída. Esses parâmetros são determinados tendo em vista a propriedade de estados de eco, existindo alguns métodos simples para a criação aleatória dos pesos e que asseguram a propriedade, conforme demonstrado em [2].

Devido a isso, o ajuste dos neurônios na camada de saída pode ser realizado com um procedimento de regressão linear, sem necessitar de um treinamento iterativo, como nas outras redes recorrentes. Esse fato economiza tempo de processamento e garante que será atingido o mínimo global da função custo utilizada.

4 Metodologia

4.1 Configurações utilizadas

4.1.1 MLP

4.1.2 LSTM e GRU

4.1.3 ESN

4.2 Estudo da autocorrelação parcial das séries temporais

4.3 Análise do melhor valor para K

5 Resultados

6 Conclusão

Analizando os resultados obtidos, percebe-se que, com exceção do cenário do sistema de Lorenz, a rede MLP foi consideravelmente pior do que as redes recorrentes. Também percebe-se que, dentre as redes recorrentes, a ESN obteve um EQM bem inferior ao obtido pela LSTM e pela GRU.

O desempenho inferior da rede MLP com relação às redes recorrentes provavelmente decorre do fato de que a relação temporal presente na LSTM, GRU e ESN auxilia na modelagem da dinâmica da série temporal. Já o pior desempenho da LSTM na série temporal do sistema de Lorenz provavelmente está relacionado aos efeitos estocásticos presentes no ajuste dos pesos sinápticos dessa rede neural que, conforme indicado em [13], é uma dificuldade em seu treinamento.

Algo interessante de mencionar é que, no geral, os desempenhos de todos os modelos estudados foram consideravelmente bons nas séries temporais dos sistemas a tempo contínuo (sistema de Lorenz e equações de Mackey-Glass), sendo que as diferenças foram mais pronunciadas na série temporal do mapa de Hénon e do mapa logístico. Provavelmente, a suavidade presente nas séries de Lorenz e de Mackey-Glass facilita a modelagem do preditor, além do fato de que as séries temporais mencionadas são bem menos erráticas se comparadas às séries de Hénon e do mapa logístico.

O principal resultado observado foi que o modelo preditor utilizando a rede com estados de eco obteve um desempenho bem superior aos outros modelos, em todos os cenários. O erro quadrático médio foi tão baixo que, observando a predição nos dados de teste, praticamente não há diferença entre os valores reais e os valores previstos. Essa superioridade da ESN também é realçada na imagem comparativa do EQM, que

indica que a ESN atingiu patamares de erro cerca de 100 ou até 10000 vezes menores que os outros modelos.

Esse resultado, aliado ao fato de que o treinamento da ESN é bem menos custoso computacionalmente se comparado ao das outras redes, mostra que esta rede é uma boa alternativa para futuros estudos de modelos preditores de séries temporais. Além disso, conforme mostrado em outros trabalhos como [14, 2, 12], a ESN também é uma boa ferramenta para outras tarefas de extração de informação, como em equalização de canais e separação de fontes.

Como sugestão de trabalhos futuros, pode ser avaliada a eficácia da ESN em reconstruir atratores através de séries temporais experimentais de sistemas caóticos. Se o desempenho para essa tarefa for tão bom quanto o obtido na predição das séries estudadas, a ESN pode tornar-se uma ferramenta ainda mais poderosa para a modelagem de sistemas com dinâmica caótica.

Referências

- [1] K. Cho, B. Van Merriënboer, C. Gulcehre, D. Bahdanau, F. Bougares, H. Schwenk, and Y. Bengio, "Learning phrase representations using rnn encoder-decoder for statistical machine translation," *arXiv preprint arXiv:1406.1078*, 2014.
- [2] H. Jaeger, "Echo state network," *scholarpedia*, vol. 2, no. 9, p. 2330, 2007.
- [3] M. Hénon, "A two-dimensional mapping with a strange attractor," *Communications in Mathematical Physics*, vol. 50, pp. 69–77, feb 1976.
- [4] R. M. May, "Simple mathematical models with very complicated dynamics," *Nature*, vol. 261, pp. 459–467, jun 1976.
- [5] E. N. Lorenz, "Deterministic nonperiodic flow," *Journal of atmospheric sciences*, vol. 20, no. 2, pp. 130–141, 1963.
- [6] M. C. Mackey and L. Glass, "Oscillation and chaos in physiological control systems," *Science*, vol. 197, no. 4300, pp. 287–289, 1977.
- [7] A. Géron, *Hands-on machine learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow: Concepts, tools, and techniques to build intelligent systems*. O'Reilly Media, 2019.
- [8] N. Fiedler-Ferrara and C. P. C. do Prado, *Caos: uma introdução*. Editora Blucher, 1994.
- [9] R. R. de Faissol Attux, "Sobre dinâmica caótica e convergência em algoritmos de equalização autodidata," dissertação (mestrado), Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação, Campinas, SP, 2001.
- [10] D. Ruelle and F. Takens, "On the nature of turbulence," *Les rencontres physiciens-mathématiciens de Strasbourg-RCP25*, vol. 12, pp. 1–44, 1971.
- [11] J. Gleick, *Chaos: The amazing science of the unpredictable*. Vintage Publishing, 1998.
- [12] L. Boccato, *Novas propostas e aplicações de redes neurais com estados de eco*. Tese (doutorado), Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação, Campinas, SP, 2013.
- [13] K. Doya *et al.*, "Bifurcations in the learning of recurrent neural networks 3," *learning (RTRL)*, vol. 3, p. 17, 1992.
- [14] H. Jaeger and H. Haas, "Harnessing nonlinearity: Predicting chaotic systems and saving energy in wireless communication," *science*, vol. 304, no. 5667, pp. 78–80, 2004.